



TITLE:

非可逆過程と確率過程 (確率過程論 と開放系の統計力学)

AUTHOR(S):

久保, 亮五

CITATION:

久保, 亮五. 非可逆過程と確率過程 (確率過程論と開放系の統計力学). 数理解析研究所講究録 1979, 367: 50-93

ISSUE DATE:

1979-10

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/104623>

RIGHT:

非可逆過程と確率過程

東大 理学部 久保 亮五

- § 1 序
- § 2 理想的なブラウン運動とその一般化
- § 3 遅れをもつ抵抗。揺動散逸定理
- § 4 ランダムな周波数変調
- § 5 マルコフ過程
- § 6 大きな系の漸近的挙動
- § 7 マルコフ過程と演算子力学
- § 8 H-定理について

非平衡状態における物理的な過程を一般的な見方ではとらえるための一つの枠組は、確率過程論である。歴史的に、非可逆過程の統計物理と、確率過程とは、深い関わり合いをもっている。ブラウン運動からはいわて近年に至る流れの中から、いくつかの問題をひもといて見る。

§ 1 序¹⁾

物理に限らず、自由度が非常に大きい系を観測し、記述し、そこに起る過程を理解するには、ミクロからマクロまで、相次ぐさまざまな段階がある。それぞれの段階は、ある粗さの眼鏡で見た像であり、そこにはその粗さに対応する法則がある。そのハイライキをつかむことがわれわれの目的である。粗視化は情報の部分的な *masking* であるから、粗い記述には必然的に確率的な要素が含まれる。時間的な過程は確率過程としてとらえられる。マクロな体系の物理的過程は、一般に非可逆過程であり、その理論は非可逆過程の統計力学と称せられる。それは Boltzmann の気体分子運動論、Einstein のブラウン運動論以来、確率過程の数学とは深い因縁にある。近年、非可逆過程、多体系の統計力学は、ひじょうに進んだ。そこで発展されたさまざまな方法もまた、本来、確率過程論に関係があるのであるが、物理的な種々の近似などの数学的な意味はあまり明らかではない。本文では、そういう流れのなかにあるものと、確率過程論的な立場から筆者が自己流にどう捉えているか、簡単に要約してみたい。数学としての体系を成していないことは御容赦いただきたい。ここに述べられることのあるものは、数学的にきちんとして定式化され、進んだ取り扱いができる筈であろう。また、あるものはひょつとすれ

は何か、新しく数学的な興味を喚起することもあるかもしれない。数学者、数理物理学者の御教示を乞う所以である。

粗視化の階段を一つ昇るとき、新しいレベルでの物理的過程は、それより下級の過程から生成される。それを一般的な意味で力とよべば、観測される過程 $X(t)$ は、その力によって駆動される。力のうち的一部分は何か統計的、確率的な性格をもつから、これを ランダム力 $R(t)$ と呼ぶこととし、 $X(t)$ の運動方程式は

$$\dot{X}(t) = F(X, R, t) \quad (1.1)$$

と仮定しよう。 X も R も一般に多次元でよい。物理ではこの種の運動方程式は Langevin eq. という。これが微分方程式であることもあろうし、積分方程式であることもある。数学としては確率微分方程式 (stochastic diff. eq.) あるいはその拡張である。

$X(t)$ の時間的発展を追う代りに、 $X(t)$ が実現する値 X が構成する状態空間に腰を据えて、(1.1) によってその空間に惹起される流れを観察してもよい。対象とする系の集団を考え、その代表集団の分布密度関数を $f(X, t)$ とすれば、

$$\frac{\partial}{\partial t} f(X, t) = -\frac{\partial}{\partial X} F(X, R, t) f(X, t) \equiv \Omega(t) f(X, t) \quad (1.2)$$

が成立つ。(1.1)が微分方程式'であれば', (1.2)はそれと特性方程式'とする偏微分方程式'であるが, distributionとしての f はいたいが, $R(t)$ によって生成される確率過程である。これは²⁾Stochastic Liouville eq.と呼ぶべきものであり, それを生成する stochastic Liouville operator Ω である。統計力学でおなじみのように, (1.1)と(1.2)はうらはらであり, 量子力学の言葉と借りれば, 前者は Heisenberg picture 後者は Schrödinger picture である。もちろん, (1.2)は数学的には厄介かもしれないが, (1.1)が非線型であつても, これは f について線型であるという利点がある。

$t=t_0$ で $X=X_0$ にあつた系が, $R(t)$ のある見本 R' によつて駆動され, 時刻 t では X_t に達したとする。これを

$$X_t(X_0, t_0; R')$$

とかけば, 遷移確率 $P(X_0, t_0 \rightarrow X, t)$ は,

$$P(X_0, t_0 \rightarrow X, t) = \langle \delta(X - X_t(X_0, t_0; R')) \rangle_{R'} \quad (1.3)$$

である。ここに $\langle \quad \rangle_{R'}$ は $R(t)$ のすべての ensemble についての平均である。一方, $f(X, t_0) = \delta(X - X_0)$ という初期条件で(1.2)を解き, 得られる確率過程 f を R について平均すれば(1.3)が求められるし, また必要なものはすべて, stochastic operator $\Omega(t)$ を含む種々の確率変数の平均値の

計算に歸着する。これは一つの有力な統一的方法である。

あるレベルに立つて、 $X(t)$ が力 $R(t)$ で駆動されると見るのは現象論である。 R と F との性格から、 X の性格を定めることは、そのレベルでの確率論的モデルとしてそこでの法則性を明らかにすることである。そのような確率論的モデルの例は物理学には数多いが、その典型は古典的、理想的なブラウン運動である。これを規準としてこれから必要な方向への拡張、一般化を試みることは、確率過程論的にもものごとを考える上にきわめて有効であろう。実際、意識すると否とに拘らず、多くの問題がそのようなして取扱われている。

§ 2. 理想的なブラウン運動とその一般化

液体媒質に浮ぶ比重が大きい物質でできた微粒子の熱運動³⁾は、理想的なブラウン運動(ちょっと工合が悪いが IBM と略記する)とみなされる。質量 m をもつ粒子の並進運動の速度 u (簡単のため 1次元とする) の運動方程式は

$$m \dot{u}(t) = -m\gamma u(t) + R(t) \equiv F(t) \quad (2.1)$$

と置く。 $F(t)$ は媒質分子が粒子に作用する力、 $-m\gamma u$ はそのうちの systematic part で粘性抵抗、 $R(t)$ は残りのランダム力である。(2.1) が IBM を記述するためには次の

3 条件が仮定される。

条件 G: $R(t)$ は定常 Gauss 過程。

条件 W: $R(t)$ は white noise

条件 L: (2.1) で表わされているように, $u(t)$ は $R(t)$ について線型である。

この理想化の物理的根拠は, ブラウン粒子が液体分子よりもずっと大きく,⁴⁾ したがってその時間尺度 $\tau_2 = 1/\gamma$ が分子的時間 τ_c に比して遙かに長いこと, 極限として

$$\tau_c / \tau_2 \rightarrow 0$$

を想定することができること(条件 W), 中央極限定理により, 多数の分子の衝突の合成としての $R(t)$ は一つの t について正規分布をもつばかりでなく確率過程として正規過程となること(条件 G), また, $\gamma = \text{一定}$ は妥当な仮定であることである。

white noise の一般的条件は, その特性汎関数から

$$\left\langle e^{i \int_{t_0}^t \xi(t') R(t') dt'} \right\rangle_R = \exp \int_{t_0}^t W[\xi(t')] dt' \quad (2.2)$$

ということである。ここに $W[\xi(t)]$ は $\xi(t)$ の汎関数であるが, 条件 G により, いまの場合,

$$W[\xi] = -\pi I_R \xi^2 \quad (2.2')$$

すなわち,

$$\left\langle \left(\int_{t_1}^{t_2} R(t') dt' \right)^2 \right\rangle = 2\pi I_R (t_2 - t_1), \quad (2.3)$$

これを

$$\langle R(t_1) R(t_2) \rangle = 2\pi I_R \delta(t_2 - t_1) \quad (2.4)$$

とかき、あるいはフーリエ成分で

$$\langle R(\omega) R^*(\omega') \rangle = I_R \delta(\omega - \omega') \quad (2.5)$$

とかくのが物理での習慣である。

数学ではふつう Gaussian white noise の積分、すなわち

$$\dot{x}(t) = R(t) \quad (2.6)$$

で表される過程 $x(t)$ をブラウン運動と呼ぶが、物理的な不可逆過程の考察のための出発点としては、これでは簡単すぎる。

(2.1) は Ornstein-Uhlenbeck 過程と呼ばれている。このモデルには、不可逆過程論の基本定理である揺動散逸定理もすでにその原型を見せている。理想的なブラウン運動の典型としてこれに求めたのはこの理由である。

条件 G, W の假定のもとに Langevin eq. (2.1) を解くにはいろいろな方法があり、それぞれに甚だ教訓的であるが、ここに立入る必要はない。ただ、それから導かれる過程 $u(t)$ の性質をまとめておこう。

a) $u(t)$ は Gaussian (G, L から)

b) $u(t)$ は Markoffian (W から)

c) $u(t)$ の相関関数は単純 (指数関数) 減衰をもつ

$$\langle u(t_0) u(t_0+t) \rangle = \langle u(t_0)^2 \rangle e^{-\gamma t} \quad (2.7)$$

(G, W, L から, Doob の定理)

d) $u(t)$ の遷移確率 $P(u_0, t_0 \rightarrow u, t)$ は Fokker-Planck eq

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial u} (\gamma u + D_u \frac{\partial}{\partial u}) P \quad (2.8)$$

の基本解

$$P(u_0, t_0 \rightarrow u, t) = \frac{\left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{1/2}}{(1 - e^{-2\gamma(t-t_0)})^{1/2}} e^{-\frac{m(u - u_0 e^{-\gamma(t-t_0)})^2}{2kT(1 - e^{-2\gamma(t-t_0)})}} \quad (2.9)$$

である。ここに

$$kT = m \langle u^2 \rangle_{eq} = \frac{\pi I_R}{m\gamma} \quad (2.10)$$

$$D_u = \frac{\gamma kT}{m} = \frac{1}{m^2} \int_0^\infty \langle R(t_0) R(t_0+t) \rangle dt \quad (2.11)$$

T は媒質液体の絶対温度で, (2.10) によってノイズ

$R(t)$ の強さを定める。 k はボルツマン定数。

(b) Markoffian property は (2.1) が u の 1 階微分方程式であることと, 条件 W による。 $u(t)$ の代りに 坐標 $x(t)$ ($\dot{x} = u$) をとれば, $x(t)$ だけでは Markoffian にはならない。しかし, もちろん, u と x の 2 成分ベクトルとしては, 1 階であるから Markoffian である。 $P(u, t)$ が 2 階の偏微分方程式である (2.8) にしたがうことは $R(t)$ が Gaussian であるからである

る。

多次元のブラウン運動, たとえば調和振動子のブラウン運動についても, 条件 G, W, L は同じことである。それらは理想的なブラウン運動の仲間に入れてもいいであろう。しかし, たとえば, ポテンシャルの場にあるブラウン粒子については, 条件 L は破られる。この場合, 粒子の運動量 $p = m\dot{x}$ と, 坐標 x について, Langevin eq. は,

$$\left. \begin{aligned} \dot{x}(t) &= p(t)/m \\ \dot{p}(t) &= -\frac{dV(x)}{dx} - \gamma p + R \end{aligned} \right\} (2.12)$$

となる。(2.8) に対応して, x, p の分布関数は,

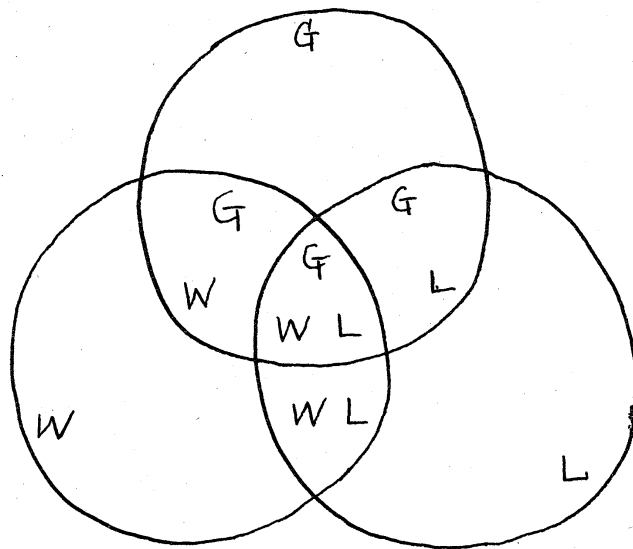
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, p, t) &= \left(-\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} \right) P(x, p, t) \\ &\quad + \gamma \frac{\partial}{\partial p} \left(p + mkT \frac{\partial}{\partial p} \right) P(x, p, t) \end{aligned} \quad (2.13)$$

によって発展する。これは Kramers 方程式 とよばれる。

過程 (x, p) は Markoffian ではないが V が x について 2 次以下でない限り, 線型性 L は成立たず, したがってガウスのでもない。(2.13) は興味ある応用をもつが, 一般にはこれを厳密に解くことはむづかしい。

この例ばかりでなく, IBM のカテゴリーではないが, フ

ブラウン運動の概念と拡張とみられる物理現象は多い。それどころか、一般にマクロな体系における少数の自由度——集団的運動の自由度 *collective modes* ——の運動は、ブラウン運動の一般化と考えるのがよい。そのようにブラウン運動を拡張すれば、IBM の範囲を越えてそれを特徴づける条件を拡張しなければならない。上述の3条件のそれぞれを、下図の円のそれぞれに対応させれば、3円の共通部分が IBM である。その外に、どれか一つ、または二つ、さらには全部を外した7個のカテゴリがあることになる。



条件を外せば、一般的な議論はむっかしくなるから、またちがった立場からの条件を加える必要も起る。以下の議論で、このような一般化を論じつくすことはもとより不可能であるが、このように、IBM の一般化という観点から、物理的に重要と思われるいくつかの問題をとり上げてみたい。

§3. 遅れをもつ抵抗 揺動散逸定理

抵抗, あるいはインピーダンスが周波数 ω に依ることは, 電気回路でも, ほかの物理的な系でごく普通である。これは抵抗が遅れをもつた効果であることを意味する。そのような系のブラウン運動を記述するためには (2.1) を次のように拡張する必要がある。⁵⁻⁷⁾

$$m \ddot{u}(t) = -m \int_{-\infty}^t \gamma(t-t') \dot{u}(t') dt' + R(t) \quad (3.1)$$

(+K(t))

振動の中の $K(t)$ は外力であるが, 平衡状態のブラウン運動はもちろん, $K=0$ の場合である。確率過程の勝手なモデルとしては, R も γ も何であってよいが, これが物理的なブラウン運動の表現だとすると, 以下に述べるように両者の間に関係をつける必要がある。

外力が $K(t) = K_0 \cos \omega t$ であるとき, それに対するブラウン粒子のレスポンスは, (3.1) の平均値の方程式からすぐにきまる。ランダム力 $R(t)$ の平均はゼロであるから,

$$\langle u(t) \rangle = \text{Re} \mu[\omega] K_0 e^{i\omega t} \quad (3.2)$$

とすると,

$$\mu[\omega] = \frac{1}{m} \frac{1}{i\omega + \gamma[\omega]} \quad (3.3)$$

ただし,

$$\gamma[\omega] = \int_0^{\infty} \gamma(t) e^{-i\omega t} dt \quad (3.4)$$

である。一方、線型応答理論 linear response theory⁸⁾ から一般に、

$$\mu[\omega] = \frac{1}{kT} \int_0^{\infty} \langle u(t_0) u(t_0+t) \rangle e^{-i\omega t} dt \quad (3.5)$$

という定理 — 第1種 揺動散逸定理 first fluctuation-dissipation theorem⁹⁾ — が成立つ。ただし u の相関関数は $k=0$ のとき、平衡状態としての $u(t)$ の定常過程に関するものである。 T は媒質の温度で、ランダム力のパワーはこれに比例している。

(3.1) は線型であるから、 $u(t)$ のパワー スペクトルは

$$I_u(\omega) = \frac{1}{m^2} \frac{I_R(\omega)}{|i\omega + \gamma[\omega]|^2} \quad (3.6)$$

によって $R(t)$ のスペクトル I_R に関係づけられる。これを用いて容易に証明されることであるが、¹⁾ ランダム力について

$$I_R(\omega) = \frac{mkT}{\pi} \Re \gamma[\omega] \quad (3.7)$$

あるいは

$$\langle R(t_0) R(t_0+t) \rangle = mkT \gamma(t) \quad (3.8)$$

を假定すると、(3.3), (3.5) の関係

$$\frac{m}{kT} \int_0^{\infty} \langle u(t_0) u(t_0+t) \rangle e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{i\omega + \gamma[\omega]} \quad (3.9)$$

が成立ち、モデル(3.1)は物理的に妥当なブラウン運動を表わすことになる。

逆に(3.1)から $R(t)$ によつてきまる定常過程 $u(t)$ が、第1種 F-D theorem, すなわち(3.9)を満足することを要求すれば(3.7), また(3.8)を証明することができる。⁶⁾

ランダム力 $R(t)$ と遅延抵抗 $\gamma(t)$ の関係は、第2種揺動散逸定理という。特に(3.7)を Nyquist の定理¹⁰⁾という。これは電気的なシステムについて端子間の雑音電圧のパワーバイインピーダンスと絶対温度で表わされることを示す。IBM についての(2.10), (2.11)はこの定理の特殊な場合であり、このような一般化によつてその深い意味を理解することが出来る。

(3.1) の代りに,

$$m \dot{u}(t) = -m \int_{t_0}^t \gamma(t-t') u(t') dt' + R'(t) \quad (3.10) \quad t \geq t_0$$

という形の Langevin eq. が用いられることが多い。このランダム力 $R'(t)$ は、(3.1)の $R(t)$ とはちがうが、(3.10)が定常過程 $u(t)$ を表現し、 $u(t)$ が(3.9)をみたすことを要求すれば、条件

$$\langle R'(t) u(t_0) \rangle = 0 \quad t \geq t_0 \quad (3.11)$$

および $R'(t)$ についての第2種 F-D theorem(3.8)が(3.10)から導かれる。逆に(3.11)を假定すれば、(3.10)から、(3.9)

および $R'(t)$ について (3.8) が直ちに導びかれる。その鍵は、 $u(t)$ および $R'(t)$ が定常過程であるとするところである。

(3.1) で、 $t \leq t_0$ での $u(t)$ の ensemble が与えられたとすれば、 $t > t_0$ での $u(t)$ の ensemble は、 $R(t)$ の ensemble からきまる。(3.10) では $u(t_0)$ の ensemble と $R'(t), t \geq t_0$ の ensemble から $t > t_0$ での $u(t)$ の ensemble がきまる。それが平衡状態としての $u(t)$ の定常過程に漸近するか、どうか。IBM についてはその一義的な近接は証明されるが、 $\gamma(t)$ のおくれがある場合、漸近性の問題は、 $\gamma(t)$ の性格にも依る筈である。そういう研究は、筆者は知らない。

(3.10) を一般化した式を、ミクロな運動方程式の変形として導く方法がある。⁷⁾ これは森の方法とよばれ、物理の実際問題にひろくを用いられている。これを簡単に述べよう。

ある力学系について力学量の一組を縦ベクトル $A(t)$ 、そのエルミート共役を横ベクトル $A^*(t)$ 、それらの運動方程式を

$$\dot{A}(t) = iLA(t), \quad \dot{A}^*(t) = -iLA^*(t) \quad (3.12)$$

とかく。¹¹⁾ その系の熱平衡状態における力学量 $X(t)$ 、 $Y(t)$ の運動について相関関数

$$\langle X(t_1), Y^*(t_2) \rangle = \langle X(t_1+t), Y^*(t_2+t) \rangle \quad (3.13)$$

が内積として定義され、¹²⁾

$$\langle iLX, Y^* \rangle = \langle X, -iLY^* \rangle \quad (3.14)$$

が成立つとする。記号を簡単にするため、任意の時刻 t_0 を $t_0 = 0$ とし、 $A(t_0) = A$, $A^*(t_0) = A^*$ とおき、

$$\langle \dot{A}, A^* \rangle \langle A, A^* \rangle^{-1} = i\Omega \quad (3.15)$$

$$R = \dot{A} - i\Omega A \quad (3.16)$$

$$R(t) = e^{(1-P)iLt} R \quad (3.17)$$

$$PX = \langle X, A^* \rangle \langle A, A^* \rangle^{-1} A \quad (3.18)$$

と定義する。相関 $\langle A, A^* \rangle$ のようなものは行列、 Ω も行列である。X は A と同様の力学量の縦ベクトルとすると、(3.18) はベクトル X を A に射影する演算子 P を定義する。(3.17) は、

$$\langle R(t), A^* \rangle = 0 \quad (3.19)$$

を意味する。(3.17) を

$$\begin{aligned} R(t) &= \left[e^{iLt} - \int_0^t e^{iLs} P iL e^{(1-P)iL(t-s)} ds \right] R \\ &= e^{iLt} R - \int_0^t ds \langle iL R(t-s), A^* \rangle \langle A, A^* \rangle^{-1} e^{iLs} A \end{aligned}$$

と変形し、 $e^{iLt} A = A(t)$, $\langle iL R(t-s), A^* \rangle = \langle R(t-s), -iL A^* \rangle$
 $= \langle R(t-s), \dot{A}^* \rangle = \langle R(t-s), R^* - A^* i\Omega \rangle = \langle R(t-s), R^* \rangle$ に注意すれば、これは

$$\dot{A}(t) = i\Omega A(t) - \int_0^t \Gamma(t-s) A(s) ds + R(t) \quad (3.20)$$

にほかならない。こゝに

$$\Gamma(t-s) = \langle R(t-s), R^* \rangle \langle A, A^* \rangle^{-1} \quad (3.21)$$

は(3.8)に、(3.19)は(3.11)に対応する。(3.20)は運動方程式の書き換えにすぎないが、 $A(t)$ と $R(t)$ とか、ミクロの運動によって変る力学量を確率過程と見た形である。観測する量 $A(t)$ よりも、ランダム力とみなされる $R(t)$ に確率過程として simple な假定をおくことが物理的によい近似であるとする根拠があれば、具体的な問題に有効に適用される。

§ 4. ランダムな周波数変調

非線型 Langevin eq. の最も簡単な、しかし基本的な例として、

$$\dot{x}(t) = i\omega(t)x(t) \quad (4.1)$$

を取上げよう。¹³⁾こゝに $\omega(t)$ は与えられた定常確率過程であるとする。これは、振動数がランダムに変調されている振動子のモデルで、この解は簡単に、

$$\begin{aligned} x(t) &= e^{i \int_0^t \omega(t') dt'} x(0) \\ &= e^{i\theta(t)} x(0) \end{aligned} \quad (4.2)$$

であるから、非線型といったが問題は trivial で、ただ

$$\dot{\theta}(t) = \omega(t) \quad (4.3)$$

という簡単な拡散過程にすぎない。しかし教訓的なのは、

$$\langle x(t) \rangle = x(0) \langle e^{i \int_0^t \omega(t') dt'} \rangle = x(0) e^{\psi(t)} \quad (4.4)$$

の挙動である。 $\omega(t)$ の相関時間まで τ_c とすると、短い時間 ($t \ll \tau_c$)、長い時間 ($t \gg \tau_c$) のそれぞれについて、次のような近似が一般に成立つ。

$$\begin{aligned} 1) \text{ 短時間近似} \quad e^{\psi(t)} &\sim e^{i \langle \omega \rangle t - \frac{1}{2} \langle \omega^2 \rangle_c t^2} \quad (4.5) \\ \text{ただし} \quad \langle \omega^2 \rangle_c &= \langle \omega^2 \rangle - \langle \omega \rangle^2 \end{aligned}$$

$$2) \text{ 長時間近似} \quad e^{\psi(t)} \sim e^{i \omega_\infty t - \gamma t} \quad (4.6)$$

短い時間ではそれぞれの振動子はある一つの振動数 ω での振動を継続する。 ω の分布のために集団平均の減衰はあるが、これは振動子の coherent な振舞いである。長い時間では、個々の振動子が、ちがった振動数の状態を次々に実現してゆく incoherent な状況にある。 $t \gg \tau_c$ で $\psi(t)/t$ が $i \omega_\infty - \gamma$ という漸近値をもつのは、(一般的な) 中心極限定理のあらわれである。もし

$$\langle \omega^2 \rangle_c \tau_c^2 \ll 1 \quad \text{または} \quad \gamma \tau_c \ll 1 \quad (4.7)$$

であれば、短時間近似の範囲では $\langle x(t) \rangle$ は殆んど減衰していない、または、減衰は長時間近似の範囲で良く記述される、ということになる。すなわち、ランダムな周波数変動

が充分速く, (4.6) のような単純な指数関数減衰が起る。これは, 物理的な系に作用する摂動の効果の現われ方として重要な概念で, motional narrowing とよばれる。このような振動子のスペクトルを観測するとき, ランダムな変調のため¹⁴⁾に起るスペクトル線のひろがり¹⁴⁾が, 変調が速くなると消失することからこの言葉は由来している。次節に述べるようにこれはマルコフ性と本質的な関連をもっている。

ランダム変調の理想化モデルには次の二つがある。

1) Gaussian random modulation:

$\omega(t)$ がガウス過程であれば,

$$e^{i\psi(t)} = \exp\left\{i\langle\omega\rangle t - \int_0^t (t-\tau) \Delta^2 \cdot \varphi(\tau) d\tau\right\} \quad (4.8)$$

$$\text{ただし,} \quad \Delta^2 = \langle\omega^2\rangle_c \equiv \langle\omega^2\rangle - \langle\omega\rangle^2$$

$$\varphi(t) = \frac{1}{\Delta^2} \langle (\omega(t_0) - \langle\omega\rangle)(\omega(t+t_0) - \langle\omega\rangle) \rangle \quad (4.9)$$

2) Poisson random modulation:

$$\omega(t) = \sum_j \alpha \delta(t-t_j) \quad (4.10)$$

は, 時刻 t_j ... がランダムで, かつその衝撃による位相のずれ α がランダム, すなわち, 振動子が, 時々, 邪魔ものに衝突するという像に対応する。単位時間あたりの衝

突の平均回数 ν とすると,

$$e^{\psi(t)} = \exp[-\nu t \{(1 - \langle \cos \alpha \rangle) - i \langle \sin \alpha \rangle\}] \quad (4.11)$$

(4.8) で $\langle \omega \rangle = 0$, $\varphi(t) = e^{-t/\tau_c}$ とすれば

$$e^{\psi(t)} = \exp[-\Delta^2 \tau_c (t - \tau_c + e^{-t/\tau_c})] \quad (4.12)$$

これは, (4.5), (4.6) の例証として良く引合いに出される。

$$\tau_c \rightarrow 0, \quad \Delta^2 \tau_c \rightarrow \tau_2^{-1} \equiv \gamma \quad (4.13)$$

の極限とすれば, $\omega(t)$ は white noise, $\theta(t)$ は単純な拡散 (Wiener 過程), (4.12) は

$$e^{\psi(t)} = e^{-t/\tau_2} \quad t > 0 \quad (4.14)$$

を与える。

(4.10) は, (2.2) の (一般的な) white noise の典型的な例である。¹⁵⁾

§ 5. マルコフ過程

ブラウン粒子の空間における拡散を考え, (1.1), (1.2) を

$$\dot{x}(t) = u(t) \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = -u(t) \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) \quad (5.2)$$

と置く。¹⁶⁾ $u(t)$ を既知, たとえば, § 2 で述べたブラウン

運動の速度とすれば, (1.3) に当る遷移確率 $P(x_0, 0 \rightarrow x, t)$ は, (5.2) と (4.1) の対応によつて次のようにして得られる。 $t=0$ で

$$f(x, 0) = \delta(x - x_0)$$

とすれば,

$$\begin{aligned} P(x, t) \equiv \langle f(x, t) \rangle &= \left\langle e^{-\int_0^t u(t') \frac{\partial}{\partial x} dt'} \right\rangle \delta(x - x_0) \\ &= \exp \left[-\langle u^2 \rangle \tau_c \left(t - \tau_c + e^{-t/\tau_c} \right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \delta(x - x_0) \end{aligned} \quad (5.3)$$

ただし (2.7) の γ を $1/\tau_c$ と書いた。これは、長時間近似 $t \gg \tau_c$ として拡散方程式,

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t), \quad D = \langle u^2 \rangle \tau_c \quad (5.4)$$

が得られることを示す。ただし, $t \gg \tau_c$ でも, x のあまり小さい範囲については, これは意味をなさない。(4.7) に対応する条件は,

$$\sqrt{\langle u^2 \rangle} \tau_c \cdot \frac{\partial}{\partial x} \ll 1 \quad (5.5)$$

である。これはまた, $l = \sqrt{\langle u^2 \rangle} \tau_c \ll \Delta x$, すなわち空間の粗視化の粗さ Δx が mean free path l よりもずっと大きいことを意味する。これと, 時間の粗視化 $\Delta t \gg \tau_c$ の二つの条件のもとに, ブラウン粒子の空間における拡散は, マルコフ過程として (5.5) で記述される。これは, §1 に述べた粗視化というものの意味を理解するのに,

最も簡単な良い例であろう。ブラウン運動において空間的な拡散方程式は、 $\ell^2/\tau_c = D$ 一定として $x/\ell \rightarrow \infty$, $t/\tau_c \rightarrow \infty$ における漸近評価に由来するのであるが、ボルツマン方程式のようなサブマクロのレベル、あるいは流体力学のようなマクロの方程式など、一般に粗視化のあるレベルにおける理想化は、これと同様の漸近評価によって基礎づけられる。¹⁷⁾

さて、そのような粗視化による理想化として、(1.1)の $R(t)$ が white noise とみなされるとしよう。これによって駆動される確率過程は、それに対して Markoffian となる。

Stochastic Liouville eq. (1.2)において、 $R(t)$ が一般的の意味で white noise であれば、(2.2)と同様。 :

$$\left\langle e^{\int_t^{t+\Delta t} \Omega(t') dt'} \right\rangle_{\text{ordered}} = e^{\int_t^{t+\Delta t} \Gamma(t') dt'} \quad (5.6)$$

が成立つであろう。¹⁸⁾ $\Omega(t)$ は一般に非可換であるので、指数関数はふつうのものでなく、この両辺とも ordered であるが、¹⁹⁾これから(1.3)の遷移確率に対して

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, t) = \Gamma P(X, t) \quad (5.7)$$

が導かれる。すなわち、(1.1)で駆動される過程 $X(t)$ はマルコフ過程である。(5.6)は white noise operator $\Omega(t)$ の定義といってもよい。特に(1.1)が $R(t)$ について1次で、か

つ $R(t)$ が Gaussian white noise であるときには, (5.7) の右辺は 2 階微分までであるから, いわゆる Fokker-Planck 方程式となる。

たとえば, $R(t)$ を Gaussian white noise として

$$\dot{x}(t) = u(x) + v(x)R(t) \quad (5.8)$$

を考えると,

$$\dot{S}(t) = -\frac{\partial}{\partial x} \{u(x) + v(x)R(t)\} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \Gamma &= -\frac{\partial}{\partial x} u(x) + \pi I_R \frac{\partial}{\partial x} v(x) \frac{\partial}{\partial x} v(x) \\ &= -\frac{\partial}{\partial x} \{u(x) - \pi I_R v(x) v'(x)\} + \frac{\partial}{\partial x} D(x) \frac{\partial}{\partial x} \quad (5.10) \end{aligned}$$

こゝに $D(x) = \pi I_R v(x)^2$ は拡散係数である, (I_R は $R(t)$ のスペクトル強度)。もっと簡単に例は, (2.1) から (2.8), (2.12) から (2.13) を導くことであるが, こゝからは $v = \text{const}$ の場合である。

(5.10) は, 確率微分方程式 (5.8) をいわゆる Stratonovich 流に解釈することに当る。もし, (5.8) を Ito 流に解釈すれば (5.10) の右辺の drift term で v を含む項はなく, かつ, 拡散項で $D(x)$ は 2 階微分記号のあとにくる。

(1.1) を Ito 流に解釈すると, $F(t)$ が white noise

であれば" 短い時間 Δt の間の発展について

$$\langle (\Delta X)^n \rangle = C_n(X, t) \Delta t + O(\Delta t^2) \quad (5.10)$$

とおける。これは, (1.3) の確率分布密度について

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial X} \right)^n C_n(X, t) P(X, t) \quad (5.11)$$

を与えるが, これはまた, Chapman-Kolmogorov eq. または物理でいう master eq. (あまりよい言葉ではない) .

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, t) = - \int W(X \rightarrow X') dX' P(X, t) + \int W(X' \rightarrow X) P(X', t) dX' \quad (5.12)$$

にはかならない。こゝに

$$C_n(X, t) = \int (X' - X)^n W(X \rightarrow X', t) dX' \quad (5.13)$$

は, 状態 X から X' への遷移確率の rate $W(X \rightarrow X', t)$ の n 次モーメントである。

(1.2) を Stratonovich 流の解釈のもとに適用しても, (5.12) に相当するものは導かれるが, (5.8) の例で見たように, (5.11) ほど簡単な形ではない。

(5.12) の形に Markoff 過程が表わされているとき, それに対応する Langevin eq. を立て, これを有効に利用すること、ことも場合によっては必要になるであろう。その場

合には, Stratonovich 流よりも Ito 流の確率微分方程式を立てる方が考え易い。

§ 6 大きな系の漸近的挙動

(5.12) のような Markoff 過程は, 物理ばかりでなく広い応用をもつ。いま, 特に, 大きな体系についてのその漸近的性格を考える。birth and death process として, 系のサイズを表わすパラメータを Ω とし, X をある種の population

$$x = X/\Omega \quad (6.1)$$

をその density とする。一様な体系では, $X \rightarrow X+r$ の遷移が起る rate は, そのサイズ Ω に比例し, かつ密度 x による, すなわち

$$W(X \rightarrow X+r, t) = \Omega w(x, r, t) \quad (6.2)$$

と假定することは, 多くの問題で妥当である。これを 示量性 extensivity の假定とよぶ。このとき, (5.13) は

$$C_n(x, t) = \int r^n w(x, r, t) dr \quad (6.3)$$

normalized moment of transition rate と定義する。

確率分布密度として, $P(x, t)$ を考えると, (5.12) は

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = H(x, \varepsilon \frac{\partial}{\partial x}, t) P(x, t), \quad \varepsilon = \Omega^{-1} \quad (6.4)$$

の形にかけられる。こゝに

$$H(x, p, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^{n-1}}{n!} p^n c_n(x, t) \quad (6.5)$$

$$= \int dr (1 - e^{-rp}) w(x, r, t)$$

である。 $\varepsilon \sim 0$ におけるこの方程式の漸近的性質は、筆者らによって論ぜられているので詳細は述べない。^{20, 21)}

興味あることの一つは、(6.4)と Schrödinger eq. とのアナロジーである。プランク定数 $\hbar \rightarrow 0$ の極限が古典力学であったのと類似して、 $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限は、

$$\dot{y} = C_1(y) \quad (6.6)$$

という決定論である。このまわりのゆらぎ、 $x-y(t)$ 、について、そのモーメントの運動方程式を導びくことができるが、特に

$$\sigma = \langle (x-y(t))^2 \rangle / \varepsilon \quad (6.7)$$

については

$$\dot{\sigma}(t) = 2 \frac{\partial C_1(y, t)}{\partial y} \sigma(t) + C_2(y, t) \quad (6.8)$$

となる。²¹⁾ これは、ゆらぎの発展が、決定論的運動法則(6.6)によって支配されることを意味し、非線型過程への散逸揺動定理の拡張とも見られる。興味ある応用は、不安定状態から安定状態への移行に伴う異常なゆらぎの増大である。²⁰⁾

(6.4) の $P(x, t)$ は Ω が大きいとき

$$P(x, t) \sim \exp \Omega \phi(x, t) \quad (6.9)$$

という形をもつのがふつうであろうと思われる。これを筆者は、確率分布密度関数の一般的な extensivity Ansatz²²⁾と呼んた。 (6.4) について、 $P(x, t_0)$ がこの形をもてば、後の時刻にもこの形をもつ、すなわち extensive property の propagation²⁰⁾ を示すことができる。²³⁾ これは鈴木によってもっと広い条件の非平衡過程へ拡張された。周知のごとく、extensivity は、熱平衡統計力学においては、熱力学的極限の存在定理であり、非平衡系へのその拡張も、基本的な意味をもつものと思われる。しかし、(6.9) で定義される $\phi(x, t)$ の一義性、解析性はむづかしい問題であろう。ふつうの場合には、変なことは起らないが、相変化のような問題では、 ϕ に異常性が現われる筈である。異常性がない素直な場合には、中心極限定理的な意味で (6.9) の漸近形は

$$P(x, t) \sim \exp \left\{ -\frac{\Omega}{2\sigma(t)} (x - y(t))^2 \right\} \quad (6.10)$$

のように、決定論的 path のまわりの正規分布となる。

$$x - y(t) = \xi / \sqrt{\Omega}, \quad P(x, t) = \bar{P}(\xi, t)$$

とおくと、(6.10) は

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{P}(\xi, t) = -\frac{\partial}{\partial \xi} C_1(y) \xi \bar{P} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} C_2(y) \bar{P} \quad (6.11)$$

という Fokker-Planck eq. の解である。²¹⁾ 右辺に y は (6.6) からきまる x の関数とみなされている。これに関連して、(6.4) の右辺の第2項までを残して Fokker-Planck eq.

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} C_1(x, t) P(x, t) + \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} C_2(x, t) P(x, t) \quad (6.12)$$

は $\varepsilon \sim 0$ における近似としてはあまり意味がないことに注意しておこう。

N 個の要素 (Ising spin) があって、その各々が $+$ 、または $-$ の状態をランダムにとるとし、 $+\rightarrow-$ 、 $-\rightarrow+$ の遷移の速さをそれぞれ

$$w_{+\rightarrow-} = \frac{1}{\tau} e^{-\mu}, \quad w_{-\rightarrow+} = \frac{1}{\tau} e^{\mu}$$

とする。釣合いでは $+$ にある確率 p_+ 、 $-$ にある確率 p_- の比は $e^{2\mu}$ となる。 N 個のうち、 $+$ にあるスピンの数を N_+ 、 $-$ にあるものの数を N_- とすれば、(5.12) は

$$N_+ - N_- = X, \quad N_+ + N_- = N$$

について次のようにかゝれる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(N_+, N_-, t) = & -\{e^{-\mu} N_+ + e^{\mu} N_+\} P(N_+, N_-, t) \\ & + e^{\mu} (N_- + 1) P(N_+ - 1, N_- + 1, t) + e^{-\mu} (N_+ + 1) P(N_+ + 1, N_- - 1, t) \end{aligned} \quad (6.13)$$

これはまた、中心に引きつけられるブラウン運動 — いわゆる Ehrenfest model²⁴⁾ — の連続時間 t への帰直しでもある。これは、(5.12) の型の問題の最も簡単な例であるが、その解は文献に見当たらないので、ここに挙げておくと、

$$P(X, 0) = \delta(X - X_0)$$

の初期条件について、 $P(X, t)$ の母関数は、

$$\begin{aligned} Q(z, t) &= \sum_X P(X, t) z^{\frac{X}{2}} \\ &= \frac{1}{(e^\mu + e^{-\mu})^N} \left[(e^\mu + e^{-\mu-rt}) z^{\frac{1}{2}} + e^{-\mu}(1-e^{-rt}) z^{-\frac{1}{2}} \right]^{\frac{N+X_0}{2}} \\ &\quad \times \left[e^\mu(1-e^{-rt}) z^{\frac{1}{2}} + (e^{-\mu} + e^{\mu-rt}) z^{-\frac{1}{2}} \right]^{\frac{N-X_0}{2}} \quad (6.14) \end{aligned}$$

$P(X, t)$ が extensive であることは明らかである。平衡状態は

$$X_{eq} = N \tanh \mu$$

であるが、 $X - X_{eq} \sim O(\sqrt{N})$ で、 $X(t)$ は Gaussian, したがって理想的なブラウン運動であるが、その範囲を越えれば

Gaussian ではなく、したがって Fokker-Planck eq. (6.12) は意味がない。(6.13) ままともには解かなくてはならないのであるが、この問題では

$$\frac{d}{dt} \langle X(t) \rangle = -\gamma (\langle X(t) \rangle - X_{eq}) \quad (6.15)$$

という簡単な指数減衰が常に成立つことに注意する価値がある。これは自由エネルギーの微分が力であり、それによつて緩和がきまる、²⁵⁾ という常識的な假定には必ずしも根拠がないことを教える。

上述のスピンの系が相互作用をもち、熱平衡としては、強磁性が低温度で実現されるという、不連続な相転移をもつ場合には、(6.13) を拡張することは甚だ興味がある。スピンの相互作用を分子場モデルに理想化し、かつスピン反転の素過程は熱浴との接触による spontaneous なものとしたモデルを Kinetic Weiss-Ising Model とよぶ。(6.13) の拡張は

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} P(N_+, N_-, t) \\ &= -[W_{+-}(N_+, N_- \rightarrow N_+-1, N_-+1) + W_{-+}(N_+, N_- \rightarrow N_++1, N_- -1)] P(N_+, N_-, t) \\ & \quad + W_{-+}(N_+-1, N_-+1 \rightarrow N_+, N_-) P(N_+-1, N_-+1, t) \\ & \quad + W_{+-}(N_++1, N_- -1 \rightarrow N_+, N_-) P(N_++1, N_- -1, t) \end{aligned} \quad (6.16)$$

$$\begin{aligned} \text{ただし } W_{+-}(N_+, N_- \rightarrow N_+-1, N_-+1) &= N_+ e^{-\mu - \frac{\alpha}{N}(N_+ - N_-)} \\ W_{-+}(N_+, N_- \rightarrow N_++1, N_- -1) &= N_- e^{\mu + \frac{\alpha}{N}(N_+ - N_-)} \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\mu = \mu_0 H / kT, \quad \alpha = J / kT$$

のように与えられる。 μ は外からかけた磁場、 α はスピン間相互作用の強さをそれぞれ熱運動の尺度 kT で表わしたパラメータである。 $\mu = 0$ のとき、 $\alpha = 1$ が分岐点であることは、(6.16) の平衡分布

$$P_e(N_+, N_-) = \frac{N!}{N_+! N_-!} e^{\mu(N_+ - N_-) + \frac{\alpha}{N}(N_+ - N_-)^2} \quad (6.18)$$

但し $\alpha > 1$ では

$$x = \frac{N_+ - N_-}{N}, \quad x = \tanh \alpha x \quad (6.19)$$

の二つの解 $x = \pm x_0(\alpha)$ に対応する二つの極大をもつことからわかる。(6.4)は

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = - \left[(1 - e^{\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}}) e^{-\mu - \alpha x} (1 + x) + (1 - e^{-\varepsilon \frac{\partial}{\partial x}}) e^{\mu + \alpha x} (1 - x) \right] P(x, t) \quad (6.20)$$

とかかれる。 $\varepsilon \rightarrow 0$ におけるこの偏微分方程式の漸近的な性質は、確率過程の分岐という観点から甚だ興味あるものである。²⁶⁾

§ 7. マルコフ過程演算子の力学

物理では、好んで Forward Kolmogorov eq.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \Gamma(x, \frac{\partial}{\partial x}) P(x, t) \quad (7.1)$$

を用いる。この adjoint eq. すなわち Backward eq.

$$\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = \Gamma^+(x, \frac{\partial}{\partial x}) g(x, t) \quad (7.2)$$

の意味は、

$$g(x, 0) \equiv g(x) \text{ としたとき,}$$

$$\begin{aligned}
 g(x, t) &= \langle g(x) \rangle_t = \int g(x, t) P(x, 0) dx \\
 &= \int g(x) P(x, t) dx \quad (7.3)
 \end{aligned}$$

すなわち、初期条件が x に確定していたとき、時刻 t における $g(x)$ の期待値は $g(x, t)$ である、ということである。

一般に、 $A(x)$, $B(x)$... $F(x)$ の時間的相関

$$\begin{aligned}
 \langle A(x_{t_1}) B(x_{t_2}) \cdots F(x_{t_n}) \rangle &\equiv \langle A(t_1) \cdots F(t_n) \rangle \\
 &= \int \int F(x_n) (x_n | e^{\Gamma(t_n - t_{n-1})} | x_{n-1}) \cdots (x_3 | e^{\Gamma(t_3 - t_2)} | x_2) B(x_2) \\
 &\quad (x_2 | e^{\Gamma(t_2 - t_1)} | x_1) A(x_1) (x_1 | e^{\Gamma(t_1 - t_0)} | x_0) P(x_0, t_0) \\
 &\quad dx_n \cdots dx_2 dx_1, \quad t_n > t_{n-1} > \cdots > t_2 > t_1 > t_0. \quad (7.4)
 \end{aligned}$$

である。こゝに量子力学における bra-ket 記号を用いたが、 $(x' | e^{\Gamma t} | x)$ は $(0, t)$ の時間のあいだでの $x \rightarrow x'$ の遷移確率である。(7.4) は簡単に

$$\int dx' \int dx (x' | F(t_n) \cdots B(t_2) A(t_1) | x) P(x, 0) \quad (7.5)$$

とかけられる。ただし $A(t) = e^{-\Gamma t} A e^{\Gamma t} \quad (7.6)$

は、 x や $\partial/\partial x$ を含み、量子力学における Heisenberg 演算子に酷似する。もっと一般に、(7.1) の発展演算子が、時間 t をあらわに含むとき、

$$\pi_t \equiv \frac{\partial}{\partial x_t}, \quad [\pi_t, x_t] = 1 \quad (7.7)$$

と定義し, "Heisenberg" 運動方程式

$$\begin{aligned}\dot{\pi}_t &= -[\Gamma(x_t, \pi_t, t), \pi_t] \\ \dot{x}_t &= -[\Gamma(x_t, \pi_t, t), x_t]\end{aligned}\quad (7.8)$$

$$\dot{A}_t = -[\Gamma(x_t, \pi_t, t), A_t], \quad A_t = A(x_t, \pi_t)$$

を, 初期条件 $x_{t=0} = x$ $\pi_{t=0} = \frac{\partial}{\partial x}$ で解き, その解を (7.5) に代入すれば, 初期分布 $P(x, 0)$ が与えられたときに所要の相関関数が求められる。マルコフ過程としての非決定論的發展は, ここで演算子の發展として表現される。量子力学とのこの形式的対応は, 実際問題にこれを応用すること²⁷⁾ができる。特に, 確率変数が, 場, たとえば, 空間坐標 \vec{r} をパラメータとする変数 $\psi(\vec{r}, t)$ であるとき, その確率的發展を表現する相関関数, あるいはグリーン関数の計算に, 場の量子論について工夫された種々の摂動展開の方法を用いることができる。これらは, Gaussian white noise を含む非線型の Langevin eq. でその發展が規定される場の問題などを扱うのに有効である。

§8 H-定理について.

最後に, Markoff 過程に関する一般的な H-theorem について一言触れておきたい。

Forward Kolmogorov eq.

$$\frac{\partial P(x, t)}{\partial t} = \Gamma(x, \frac{\partial}{\partial x}, t) P(x, t) \quad (8.1)$$

について、時刻 s における二つの異なる初期分布から出発した解を、 $\psi_1(x, t)$, $\psi_2(x, t)$ とおく。 $C(\xi)$ ($\xi \geq 0$) を任意の 上に凸な関数として

$$H_C(t) = \int dy C\left(\frac{\psi_2(y, t)}{\psi_1(y, t)}\right) \psi_1(y, t) \quad (8.2)$$

を定義すれば

$$[定理] \quad H_C(t_1) \leq H_C(t_2), \quad s \leq t_1 \leq t_2 \quad (8.3)$$

が成立つ。証明は次の通りである。

$w_i \geq 0$ $\sum_i w_i = 1$ に対して、上に凸な関数 $C(\xi)$ について

$$\sum_i C(\xi_i) w_i \leq C(\sum w_i \xi_i) \quad (8.4)$$

が成立つ。時間区間 (t_1, t_2) における遷移確率を

$P(t_1, x | t_2, y)$ とすれば、 $P(t_1, x | t_2, y) \geq 0$ が

$$\int \psi_1(x, t_1) dx P(t_1, x | t_2, y) = \psi_1(y, t_2) \quad (8.5)$$

$$\int P(t_1, x | t_2, y) dy = 1 \quad (8.6)$$

である。

$$w(x) = \frac{\psi_1(x, t_1) P(t_1, x | t_2, y)}{\psi_1(y, t_2)}$$

さえれば、不等式(8.4)から

$$\int dx C\left(\frac{\psi_2(x, t_1)}{\psi_1(x, t_1)}\right) \psi_1(x, t_1) P(x|y, t_2) \leq C\left(\frac{\psi_2(y, t_2)}{\psi_1(y, t_2)}\right) \psi_1(y, t_2),$$

これを y について積分すれば(8.3)を得る。

特に $C(\xi) = -\xi \log \xi$ とすれば、(8.2)は

$$H(t) = -\int dx \psi_2(x, t) \log \frac{\psi_2(x, t)}{\psi_1(x, t)} \quad (8.7)$$

と与える。 ψ_1 と ψ_2 を入れ換えたものとを加えて

$$H(t) = \int dx (\psi_2(x, t) - \psi_1(x, t)) \log \frac{\psi_1(x, t)}{\psi_2(x, t)} \quad (8.8)$$

としてもよい。(8.8)の形のH関数についてのH-定理は定常マルコフ過程について Lebowitz らによつて与えられている²⁸⁾が、この定理はもっと一般で、非定常過程についても成立つ。また、遷移確率行列の対称性(detailed balance)²⁹⁾も必要ではない。

特に定常過程で、ある平衡分布(invariant measure)が存在するときには、(8.7)の ψ_1 を平衡分布 ψ_e としてよい。そのようなH関数の増大は(ψ_e が一義的であれば)、平衡への近接を表わす。

ここで注意しておきたいのは、(8.1)の Γ が時間も含まれに含み非定常過程に関するH定理の意味である。この場

合、平衡分布は存在していないが、H定理は、異なる初期条件から出発した二つの過程が、時間の経過とともに一つの確率過程に漸近するか、どうか、という問いに対する答の一つの鍵を与えるものと思われる。(8.8)のH関数について

$$H(t) < 0, \quad H(t_1) \leq H(t_2), \quad t_1 < t_2$$

$$H(t) = 0 \quad \text{if} \quad \psi_1(x, t) = \psi_2(x, t)$$

であるから、 $\psi_1 = \psi_2$ になるまで $H(t)$ が増大し続けるなら、非定常マルコフ過程の初期条件によらない終局過程への一義的な近接がいええるわけである。しかし、 $\psi_1 \neq \psi_2$ でも、 $H(t) \rightarrow 0$ となることはある。たとえば、単純な拡散過程はこの例である。

物理的現象の多くのものでは、このような意味での終局過程の一義性は成立っている。たとえば、§2のブラウン運動において、時間とともに変る（たとえば周期的な）外力が加わった場合、充分時間が経てば初期条件の影響が消えることは明らかである。エルゴード性の問題を、非定常過程にどう一般化するのか、どれほどのことがなされているかわからないが、興味がある、というだけでなく、非可逆過程の物理として一つの基礎的な問題であると思われる。

Reference および補註

- 1) 本論の全体に対する参考として 「統計物理学」 第5章 第6章 (久保), 岩波講座 現代物理学の基礎 [第2版] 5.
- 2) R. Kubo: J. Math. Phys. 4 144 (1963).
- 3) Ref. 1) のほか, 有名な review paper として,
S. Chandrasekhar: Rev. Mod. Phys. 15 1 (1943)
M. C. Wang & G. E. Uhlenbeck: Rev. Mod. Phys. 17
323 (1945) がある。こゝでの議論には, 特に後者が
よい参考となろう。
- 4) 正確にいえば, ブラウン粒子の密度 ρ_0 が, 液体媒質の密度 ρ よりも遙かに大きいこと, $(\rho/\rho_0 \rightarrow 0)$ がさらに要求される。この比が 1 の程度である場合には, 粒子の運動に伴う流体の流れが, 再び粒子に力を及ぼし, §3 に述べるような遅れをもつ抵抗が作用する。³⁰⁾
- 5) R. Kubo: in Tokyo Summer Lectures in Theoretical Physics 1965 Part I Many-Body Theory, ed. R. Kubo.
(Shokabo)
- 6) R. Kubo: Rep. on Progress in Physics 29 Part 1. 255 (1966).
- 7) H. Mori: Progr. Theor. Physics (Kyoto) 33 423 (1965)

8) R. Kubo: J. Phys. Soc. Japan 12 570 (1957).

9) 略して FDT という。

10) H. Nyquist: Phys. Rev. 32 110 (1928).

11) これは多少誤解を招く書き方であろう。古典力学の場合

$$\begin{aligned} \text{Hamilton eq.} \quad \dot{p}_t &= -\frac{\partial H(p_t, q_t)}{\partial q_t} \\ \dot{q}_t &= \frac{\partial H(p_t, q_t)}{\partial p_t} \end{aligned} \quad (1)$$

の解は, $t=0$ における p_t, q_t を p, q , と記し.

$$p_t = e^{-i\mathcal{L}t} p, \quad q_t = e^{-i\mathcal{L}t} q$$

とあらわされる。但し

$$i\mathcal{L}(p, q) f(p, q) = \left(\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \right) f(p, q)$$

は, あつうの Liouville operator である。したがって

p_t, q_t の関数である力学量 $A_t = A(p_t, q_t)$ について

$$A_t = e^{-i\mathcal{L}t} A(p, q) \quad (2)$$

が成立つ。これは A_t を初期位相 p, q の関数として表

わす。量子力学の場合の Heisenberg 運動方程式,

$$\dot{A}_t = \frac{i}{\hbar} [H, A_t] \quad (3)$$

も, 元来は (H が時間に依る場合も含めて) (1) と同様の意味

である。特に H が t にあらわには依らない場合, 解は

$$A_t = e^{\frac{t}{\hbar} H} A e^{-\frac{t}{\hbar} H} \quad (4)$$

と書くのは, (2) と同じ意味である。

12) 熱平衡の近くの問題には, canonical correlation⁶⁾

$$\langle A; B \rangle = \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \operatorname{Tr} \rho_e e^{\lambda H} A e^{-\lambda H} B$$

を用いるのが適切である。こゝに $\beta = 1/kT$, ρ_e は平衡
をあらわす密度行列 $\rho_e = e^{-\beta H} / \operatorname{Tr} e^{-\beta H}$, H はその系の
ハミルトニアンである。

13) R. Kubo, in "Fluctuation, Relaxation and Resonance
in Magnetic Systems" Scottish Universities' Summer
School p. 23 (1961) ed. D. ter Haar, Oliver &
Boyd. Ref. 1)

14) この問題の種々の具体的な例については, R. Kubo,
A Stochastic Theory of Line-Shape, in Advances
in Chemical Physics, Conf. on Stochastic Processes in
Chemical Physics, ed. K. Shuler John Wiley. 1969
pp. 101-127

15) (4.8), (4.11) は, 擾動の二つの理想的な型を代表してい
る。1) の型は, 弱い擾動が常時働らく場合で, その擾動の
大きさ (Δ) とその変化の速さ ($1/\tau_c$) の比 $\Delta \cdot \tau_c$ が小さ
いとき, その擾動は, その系の変化にマルコフ性を与える。
量子力学で擾動によって状態の遷移が確率的に起るとし,
その確率を2次擾動計算で求めるのは, まさに (4.13) のよ

を計算することにはならない。このことを詳細には述べな
 がつたが、本節および §5 の所論から読み取れるであら
 う。2) の型は、強い摂動が稀に起る場合である。一つ一
 つの摂動の作用は衝突としてキャンセル取扱おうが、衝突の
 生起が確率的とみなされる。実際の物理の問題は、これら
 の典型から外れている現実を如何に処理するかということ
 である。その方法は近代的な量子統計力学のさまざまな手
 法である。それらを確率過程論の立場で見直すことは確
 率過程論としても有用であるが、あまり行なわれていない。

16) 1), 13) 参照。

$$f(x, t) = \int e^{ikx} f_k(t) dk$$

のようにフーリエ展開すれば、(5.2) は

$$\frac{\partial}{\partial t} f_k(t) = -ik u(t) f_k(t)$$

となる。確率変数 $f_k(t)$ について、これは (4.1) と同型
 である。(5.5) は波数 k について $k\ell \ll 1$ を意味する。

17) H. Mori, M. Tokuyama & T. Morita: Suppl. Progr. Theor.

Physics No 64 (1978) p. 50. 本講究録 森肇氏の報告

18) R. Kubo: J. Phys. Soc. Japan. 17 1100 (1962), Ref. 2)

19) 異なる t に関して非可換な演算子 $A(t)$ について

$$\frac{dU}{dt} = A(t)U(t), \quad \frac{dV}{dt} = V(t)A(t), \quad U(0) = V(0) = 1$$

で定義される指数演算子 $U(t)$, $V(t)$ は

$$U(t) = e_{\leftarrow}^{\int_0^t A(t') dt'}, \quad V(t) = e_{\rightarrow}^{\int_0^t A(t') dt'}$$

のように記し (これは自己流), 矢印の向きに order された指数関数演算子という。

20) R. Kubo, K. Matsuo, & K. Kitahara: J. Stat. Phys.

9 51 (1973)

21) N. G. van Kampen: Can. J. Phys. 39 551 (1961)

van Kampen, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, E. G. D. Cohen ed. Amsterdam (1962) p. 173.

22) R. Kubo, in *Synergetics*, Haken ed. BG Teubner
Stuttgart 1973)

23) M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. 53 1657 (1975)

57 746 (1977), 59 1765 (1978). J. Stat. Phys.

20 163 (1979)

24) 単位時間ごとに random walker が ± 1 のステップをもち

つとし, 時刻 s に位置 m にいる確率 $P(m, s)$ は

$$P(m, s) = \frac{R+m+1}{2R} P(m+1, s-1) + \frac{R-m+1}{2R} P(m-1, s-1)$$

に従おうとする。 R はある整数。

25) ある熱力学変数 X の関数として考えている系の自由エ

ネルギーが $F(X, T)$ (T は温度) であるとする。 T 一定

条件で, X を動かす熱力学的な力は $-\partial F/\partial X$ であるから, 非平衡状態での X の確率 $P(X, t)$ が

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, t) = \frac{\partial}{\partial X} \left(\gamma \left(\frac{\partial F}{\partial X} + kT \frac{\partial}{\partial X} \right) P(X, t) \right)$$

で与えられる, と考えたくなる。しかし (6.13) は決してこのようには近似されない ($X \sim O(\sqrt{N})$ の場合を除いて)。

26) たとえば (6.6) が

$$\dot{y} = \gamma y \left(1 - \frac{y^2}{a^2} \right)$$

という形をもつていけば $y=0$ は不安定点, $y=\pm a$ は安定点である。 $y=0$ の近くから出発して $y=\pm a$ へ分岐する過程に伴うゆらぎの変化はこの種の問題である。これについては M. Suzuki: Suppl. Prog. Theor. Phys. No 64 (1978) 402 を見よ。不安定状態から熱力学的安定状態に移行する過程での空間的なゆらぎの生成は, 二成分溶液系などの観測される spinodal decomposition の現象で統計物理としての興味を呼んでいる。

27) K. Kawasaki: Ann. Phys. 61 1 (1970)

P. C. Martin, E. D. Siggia & H. A. Rose: Phys. Rev.

A 8 423 (1973), U. Dekker & H. Haake, Phys. Rev.

A 11 2043 (1975), C. P. Enz & L. Garrido: Phys.

Rev. A 14 1258 (1976), L. Garrido & M. San Miguel:

Prog. Theor. Phys. 59 40, 55 (1978),

C. P. Enz: in *Critical Phenomena* (Lecture Note in Physics. 54, Springer) ed. J. Brey & R. B. Jones (1976) pp. 80-110.

28) J. L. Lebowitz and P. G. Bergmann: *Ann. Phys.* 1 1 (1957).

29) 定常マルコフ過程について, 不変測度が存在する場合, 遷移確率の対称性, あるいは detailed balance の仮定なしで H-定理を証明することは多くの人々によってなされたが, その最初は K. Yosida: *Proc. Imp. Acad. Tokyo* 10 43 (1940) であり。なお, K. Yosida: *Functional Analysis*, Springer 1965 p. 379 以下 参照。伏見康治: 確率論及統計論 河出書房 (昭16) に吉田氏の所論の引用がある。これより後れて独立にこれに言及したものに E. C. G. Stuekelberg: *Helv. Phys. Acta.* 25 577 (1952) 等がある。

なお, 本文に与えた定理 (8.3) は, 内容的に最も一般であろう (R. Kubo: unpublished note). 関数 $C(\xi)$ として $-\xi \log \xi$ をえらぶ理由は, これが extensivity をもつからである。

30) 補註 4) にさらに補足する。有限な密度 ρ_0 , 半径 a の球形ブラウン粒子が, 密度 ρ , 粘性係数 η の液体媒質

中で行なうブラウン運動は, Langevin eq.

$$m^* \dot{u} + \beta u + \alpha \int_{-\infty}^t dt' \frac{\dot{u}(t')}{\sqrt{t-t'}} = R(t) \quad (1)$$

によって記述される。こゝに

$$m^* = m + \frac{2}{3} \pi a^3 \rho, \quad m = \frac{4}{3} \pi a^3 \rho_0$$

$$\alpha = 6 \pi a^2 \rho (\nu/\pi)^{1/2}$$

$$\beta = 6 \pi \nu \rho a$$

A. Widom: Phys. Rev. A 3 1027 (1971), R. M. Mazo:

J. Chem. Phys. 54 3712 (1971), K. M. Case:

Phys. Fluid 14 2091 (1971) etc.

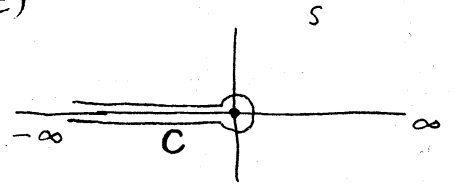
(1) から

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{m^*} \left[\beta + \Gamma(1/2) (i\omega)^{1/2} \right]$$

(3.9) の逆変換として速度 $u(t)$ の相関関数を求めると,

$$\langle u(t_0) u(t_0+t) \rangle = \frac{kT}{m^*} \phi(t)$$

$$\phi(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_C \frac{e^{st} ds}{s + a s^{1/2} + b}$$



ただし 積分路は図の通りである。また

$$a = \Gamma(1/2) \alpha / m^*, \quad b = \beta / m^*$$

$$\sigma = a b^{-1/2} = \left(\frac{9}{2} \frac{\rho}{\rho_0 + \rho/2} \right)^{1/2}$$

$$\tau = b t$$

として

$$\phi(t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2 t} \sigma x^2 dx}{(x^2 - 1)^2 + \sigma^2 x^2}$$

(R. Kubo: unpublished note) $\sigma \rightarrow 0$ の極限では

$\phi(t) = e^{-bt}$ であるが、 $\sigma > 0$ では t の大きいところでは

$$\phi(t) \sim \frac{\sigma}{2\sqrt{\pi}} (bt)^{-\frac{3}{2}}$$

この足の長い減衰は, B. J. Alder & T. E. Wainwright:

Phys. Rev. A 18 (1970) の計算機シミュレーションによって見
出され, (non-Markoffian) long time tail として関心を呼
んだ。ただし, $\rho/\rho_0 \rightarrow 0$ が IBM に必要なことは古
く H. A. Lorentz が注意している。

[附記] こゝでは主として古典力学的な系を念頭において述
べているが、量子力学的な系の確率過程論的な発展も、こゝ
に論じた問題に関してはあまり本質的なちがいはない。実際、
量子力学的な系への応用は数多くなされている。

1979. 6. 6 稿